```
data_lach1

_audit_creation_method            SHELXL-97
_chemical_name_systematic
;
 ?
;
_chemical_name_common             (NBu4)2(NEt4)H[SiW10O36(EtPO)2]
_chemical_melting_point           ?
_chemical_formula_moiety          ?
_chemical_formula_sum
 'C44 H103 N3 O38 P2 Si W10'
_chemical_formula_weight          3210.82

loop_
 _atom_type_symbol
 _atom_type_description
 _atom_type_scat_dispersion_real
 _atom_type_scat_dispersion_imag
 _atom_type_scat_source
 'C'  'C'   0.0181   0.0091
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'H'  'H'   0.0000   0.0000
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'O'  'O'   0.0492   0.0322
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'Si'  'Si'   0.2541   0.3302
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'P'  'P'   0.2955   0.4335
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'W'  'W'  -5.4734   5.5774
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'N'  'N'   0.0311   0.0180
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'

_symmetry_cell_setting            Orthorhombic
_symmetry_space_group_name_H-M    'Pn21a'

loop_
 _symmetry_equiv_pos_as_xyz
 'x, y, z'
 '-x, y+1/2, -z'
 '-x+1/2, y+1/2, z+1/2'
 'x+1/2, y, -z+1/2'

_cell_length_a                    21.9890(9)
_cell_length_b                    25.4008(9)
_cell_length_c                    13.8974(6)
_cell_angle_alpha                 90.00
_cell_angle_beta                  90.00
_cell_angle_gamma                 90.00
_cell_volume                      7762.2(5)
_cell_formula_units_Z             4
_cell_measurement_temperature     293(2)
_cell_measurement_reflns_used     ?
_cell_measurement_theta_min       3.5
_cell_measurement_theta_max       70.7

_exptl_crystal_description        ?
_exptl_crystal_colour             Colourless
_exptl_crystal_size_max           0.1
_exptl_crystal_size_mid           0.1
_exptl_crystal_size_min           0.1
_exptl_crystal_density_meas       ?
_exptl_crystal_density_diffrn     2.748
```

```
_exptl_crystal_density_method     'not measured'
_exptl_crystal_F_000              5904
_exptl_absorpt_coefficient_mu     27.818
_exptl_absorpt_correction_type    empirical
_exptl_absorpt_correction_T_min   ?
_exptl_absorpt_correction_T_max   ?
_exptl_absorpt_process_details    'Sadabs'

_exptl_special_details
;
 ?
;

_diffrn_ambient_temperature       293(2)
_diffrn_radiation_wavelength      1.54178
_diffrn_radiation_type            CuK\a
_diffrn_radiation_source          'fine-focus sealed tube'
_diffrn_radiation_monochromator   graphite
_diffrn_measurement_device_type   'Bruker Smart 6000 CCD'
_diffrn_measurement_method        'CCD scans'
_diffrn_detector_area_resol_mean  ?
_diffrn_standards_number          ?
_diffrn_standards_interval_count  ?
_diffrn_standards_interval_time   ?
_diffrn_standards_decay_%         ?
_diffrn_reflns_number             46156
_diffrn_reflns_av_R_equivalents   0.0631
_diffrn_reflns_av_sigmaI/netI     0.0596
_diffrn_reflns_limit_h_min        -26
_diffrn_reflns_limit_h_max        26
_diffrn_reflns_limit_k_min        -30
_diffrn_reflns_limit_k_max        27
_diffrn_reflns_limit_l_min        -16
_diffrn_reflns_limit_l_max        15
_diffrn_reflns_theta_min          3.48
_diffrn_reflns_theta_max          70.69
_reflns_number_total              13465
_reflns_number_gt                 10757
_reflns_threshold_expression      >2sigma(I)


_computing_data_collection        SMART
_computing_cell_refinement        SAINTPLUS
_computing_data_reduction         SAINTPLUS
_computing_structure_solution     SHELXTL
_computing_structure_refinement   SHELXTL

_refine_special_details
;
 Refinement of F^2^ against ALL reflections.  The weighted R-factor
wR and
 goodness of fit S are based on F^2^, conventional R-factors R are
based
 on F, with F set to zero for negative F^2^. The threshold expression
of
 F^2^ > 2sigma(F^2^) is used only for calculating R-factors(gt) etc.
and is
 not relevant to the choice of reflections for refinement.  R-factors
based
 on F^2^ are statistically about twice as large as those based on F,
and R-
 factors based on ALL data will be even larger.
;

_refine_ls_structure_factor_coef  Fsqd
_refine_ls_matrix_type            full
```

```
_refine_ls_weighting_scheme       calc
_refine_ls_weighting_details
 'calc w=1/[\s^2^(Fo^2^)+(0.0325P)^2^+22.4330P] where P=(Fo^2^+2Fc^2
^)/3'
_atom_sites_solution_primary      direct
_atom_sites_solution_secondary    difmap
_atom_sites_solution_hydrogens    geom
_refine_ls_hydrogen_treatment     constr
_refine_ls_extinction_method      none
_refine_ls_extinction_coef        ?
_refine_ls_abs_structure_details
 'Flack H D (1983), Acta Cryst. A39, 876-881'
_refine_ls_abs_structure_Flack    0.46(2)
_refine_ls_number_reflns          13465
_refine_ls_number_parameters      884
_refine_ls_number_restraints      627
_refine_ls_R_factor_all           0.0580
_refine_ls_R_factor_gt            0.0402
_refine_ls_wR_factor_ref          0.0943
_refine_ls_wR_factor_gt           0.0862
_refine_ls_goodness_of_fit_ref    1.072
_refine_ls_restrained_S_all       1.061
_refine_ls_shift/su_max           0.124
_refine_ls_shift/su_mean          0.005

loop_
 _atom_site_label
 _atom_site_type_symbol
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z
 _atom_site_U_iso_or_equiv
 _atom_site_adp_type
 _atom_site_occupancy
 _atom_site_symmetry_multiplicity
 _atom_site_calc_flag
 _atom_site_refinement_flags
 _atom_site_disorder_assembly
 _atom_site_disorder_group
C1 C 0.9383(6) 0.1718(17) 0.2024(10) 0.059(3) Uani 1 1 d U . .
H1A H 0.9094 0.1431 0.2049 0.071 Uiso 1 1 calc R . .
H1B H 0.9154 0.2044 0.1993 0.071 Uiso 1 1 calc R . .
C2 C 0.9756(9) 0.1667(16) 0.1133(12) 0.083(5) Uani 1 1 d U . .
H2A H 0.9497 0.1690 0.0579 0.100 Uiso 1 1 calc R . .
H2B H 0.9960 0.1332 0.1135 0.100 Uiso 1 1 calc R . .
H2C H 1.0052 0.1944 0.1112 0.100 Uiso 1 1 calc R . .
C3 C 0.9003(5) 0.1725(16) 0.7491(10) 0.053(3) Uani 1 1 d U . .
H3A H 0.8738 0.2024 0.7383 0.064 Uiso 1 1 calc R . .
H3B H 0.8763 0.1409 0.7400 0.064 Uiso 1 1 calc R . .
C4 C 0.9222(7) 0.1740(16) 0.8528(10) 0.067(5) Uani 1 1 d U . .
H4A H 0.8877 0.1755 0.8951 0.080 Uiso 1 1 calc R . .
H4B H 0.9471 0.2046 0.8624 0.080 Uiso 1 1 calc R . .
H4C H 0.9454 0.1429 0.8663 0.080 Uiso 1 1 calc R . .
C5 C 0.2839(11) 0.4016(9) 0.7133(19) 0.091(8) Uani 1 1 d DU . .
H5A H 0.2541 0.3887 0.6675 0.110 Uiso 1 1 calc R . .
H5B H 0.2920 0.3735 0.7589 0.110 Uiso 1 1 calc R . .
C6 C 0.2578(13) 0.4478(13) 0.766(3) 0.172(15) Uani 1 1 d DU . .
H6A H 0.2634 0.4791 0.7273 0.206 Uiso 1 1 calc R . .
H6B H 0.2803 0.4527 0.8255 0.206 Uiso 1 1 calc R . .
C7 C 0.1906(13) 0.4420(13) 0.790(3) 0.190(14) Uani 1 1 d DU . .
H7A H 0.1778 0.4726 0.8264 0.228 Uiso 1 1 calc R . .
H7B H 0.1678 0.4418 0.7303 0.228 Uiso 1 1 calc R . .
C8 C 0.175(2) 0.3960(19) 0.843(4) 0.22(2) Uani 1 1 d DU . .
H8A H 0.1469 0.4052 0.8935 0.265 Uiso 1 1 calc R . .
H8B H 0.2111 0.3812 0.8714 0.265 Uiso 1 1 calc R . .
H8C H 0.1566 0.3707 0.8012 0.265 Uiso 1 1 calc R . .
```

C9 C 0.3901(11) 0.4315(8) 0.7256(16) 0.084(6) Uani 1 1 d DU . .
H9A H 0.3781 0.4643 0.7557 0.101 Uiso 1 1 calc R . .
H9B H 0.4270 0.4380 0.6893 0.101 Uiso 1 1 calc R . .
C10 C 0.4037(11) 0.3900(10) 0.8057(18) 0.118(8) Uani 1 1 d DU . .
H10A H 0.3704 0.3892 0.8514 0.141 Uiso 1 1 calc R . .
H10B H 0.4072 0.3553 0.7770 0.141 Uiso 1 1 calc R . .
C11 C 0.4629(13) 0.4038(15) 0.858(2) 0.161(11) Uani 1 1 d DU . .
H11A H 0.4570 0.4374 0.8899 0.193 Uiso 1 1 calc R . .
H11B H 0.4695 0.3776 0.9074 0.193 Uiso 1 1 calc R . .
C12 C 0.5195(13) 0.4075(16) 0.799(3) 0.172(14) Uani 1 1 d DU . .
H12A H 0.5536 0.4138 0.8407 0.206 Uiso 1 1 calc R . .
H12B H 0.5159 0.4361 0.7541 0.206 Uiso 1 1 calc R . .
H12C H 0.5255 0.3752 0.7646 0.206 Uiso 1 1 calc R . .
C13 C 0.3334(10) 0.4570(9) 0.5871(19) 0.086(6) Uani 1 1 d DU . .
H13A H 0.3710 0.4608 0.5513 0.104 Uiso 1 1 calc R . .
H13B H 0.3265 0.4898 0.6211 0.104 Uiso 1 1 calc R . .
C14 C 0.2806(13) 0.4495(13) 0.5132(19) 0.117(9) Uani 1 1 d DU . .
H14A H 0.2797 0.4133 0.4914 0.140 Uiso 1 1 calc R . .
H14B H 0.2420 0.4573 0.5439 0.140 Uiso 1 1 calc R . .
C15 C 0.2898(17) 0.4861(14) 0.427(3) 0.159(12) Uani 1 1 d DU . .
H15A H 0.2971 0.5213 0.4516 0.191 Uiso 1 1 calc R . .
H15B H 0.2522 0.4871 0.3909 0.191 Uiso 1 1 calc R . .
C16 C 0.342(2) 0.4717(18) 0.358(3) 0.20(2) Uani 1 1 d DU . .
H16A H 0.3449 0.4980 0.3081 0.245 Uiso 1 1 calc R . .
H16B H 0.3341 0.4380 0.3289 0.245 Uiso 1 1 calc R . .
H16C H 0.3797 0.4703 0.3925 0.245 Uiso 1 1 calc R . .
C17 C 0.3618(9) 0.3629(8) 0.6106(15) 0.065(5) Uani 1 1 d DU . .
H17A H 0.3605 0.3351 0.6583 0.079 Uiso 1 1 calc R . .
H17B H 0.3319 0.3545 0.5617 0.079 Uiso 1 1 calc R . .
C18 C 0.4248(13) 0.3624(10) 0.564(2) 0.114(10) Uani 1 1 d DU . .
H18A H 0.4258 0.3890 0.5135 0.137 Uiso 1 1 calc R . .
H18B H 0.4549 0.3719 0.6115 0.137 Uiso 1 1 calc R . .
C19 C 0.4421(11) 0.3110(9) 0.5209(18) 0.075(6) Uani 1 1 d DU . .
H19A H 0.4601 0.2887 0.5698 0.090 Uiso 1 1 calc R . .
H19B H 0.4062 0.2934 0.4961 0.090 Uiso 1 1 calc R . .
C20 C 0.4857(18) 0.3196(13) 0.443(3) 0.22(3) Uani 1 1 d DU . .
H20A H 0.4961 0.2865 0.4141 0.262 Uiso 1 1 calc R . .
H20B H 0.5218 0.3358 0.4683 0.262 Uiso 1 1 calc R . .
H20C H 0.4679 0.3422 0.3953 0.262 Uiso 1 1 calc R . .
C21 C 0.1333(19) 0.4234(17) 0.233(4) 0.216(17) Uani 1 1 d DU . .
H21A H 0.1536 0.4225 0.2949 0.259 Uiso 1 1 calc R . .
H21B H 0.1183 0.3881 0.2212 0.259 Uiso 1 1 calc R . .
C22 C 0.1802(18) 0.4336(16) 0.161(4) 0.204(18) Uani 1 1 d DU . .
H22A H 0.2022 0.4647 0.1816 0.245 Uiso 1 1 calc R . .
H22B H 0.1594 0.4430 0.1016 0.245 Uiso 1 1 calc R . .
C23 C 0.2263(18) 0.3932(17) 0.136(3) 0.186(16) Uani 1 1 d DU . .
H23A H 0.2084 0.3684 0.0909 0.223 Uiso 1 1 calc R . .
H23B H 0.2601 0.4102 0.1034 0.223 Uiso 1 1 calc R . .
C24 C 0.2493(18) 0.3644(17) 0.220(3) 0.20(2) Uani 1 1 d DU . .
H24A H 0.2746 0.3359 0.1984 0.238 Uiso 1 1 calc R . .
H24B H 0.2157 0.3507 0.2559 0.238 Uiso 1 1 calc R . .
H24C H 0.2726 0.3878 0.2593 0.238 Uiso 1 1 calc R . .
C25 C 0.0216(17) 0.4302(15) 0.245(3) 0.176(11) Uani 1 1 d DU . .
H25A H 0.0157 0.4137 0.1832 0.211 Uiso 1 1 calc R . .
H25B H -0.0104 0.4560 0.2537 0.211 Uiso 1 1 calc R . .
C26 C 0.0147(15) 0.3898(16) 0.320(3) 0.195(13) Uani 1 1 d DU . .
H26A H 0.0217 0.4051 0.3830 0.234 Uiso 1 1 calc R . .
H26B H 0.0443 0.3620 0.3102 0.234 Uiso 1 1 calc R . .
C27 C -0.0515(14) 0.3663(17) 0.315(3) 0.198(13) Uani 1 1 d DU . .
H27A H -0.0818 0.3940 0.3146 0.238 Uiso 1 1 calc R . .
H27B H -0.0566 0.3445 0.2584 0.238 Uiso 1 1 calc R . .
C28 C -0.056(2) 0.3329(18) 0.408(3) 0.217(16) Uani 1 1 d DU . .
H28A H -0.0970 0.3205 0.4161 0.261 Uiso 1 1 calc R . .
H28B H -0.0450 0.3541 0.4628 0.261 Uiso 1 1 calc R . .
H28C H -0.0289 0.3033 0.4040 0.261 Uiso 1 1 calc R . .
C29 C 0.0696(18) 0.4961(13) 0.3323(19) 0.152(9) Uani 1 1 d DU . .

H29A H 0.0906 0.5280 0.3134 0.183 Uiso 1 1 calc R . .
H29B H 0.0266 0.5046 0.3299 0.183 Uiso 1 1 calc R . .
C30 C 0.082(2) 0.4912(13) 0.433(2) 0.169(10) Uani 1 1 d DU . .
H30A H 0.1237 0.4785 0.4391 0.202 Uiso 1 1 calc R . .
H30B H 0.0558 0.4641 0.4584 0.202 Uiso 1 1 calc R . .
C31 C 0.076(2) 0.5382(13) 0.495(2) 0.192(16) Uani 1 1 d DU . .
H31A H 0.0353 0.5525 0.4878 0.231 Uiso 1 1 calc R . .
H31B H 0.1047 0.5649 0.4739 0.231 Uiso 1 1 calc R . .
C32 C 0.088(2) 0.5253(16) 0.601(2) 0.192(17) Uani 1 1 d DU . .
H32A H 0.1168 0.5496 0.6267 0.287 Uiso 1 1 calc R . .
H32B H 0.1031 0.4901 0.6064 0.287 Uiso 1 1 calc R . .
H32C H 0.0502 0.5282 0.6363 0.287 Uiso 1 1 calc R . .
C33 C 0.0694(17) 0.5000(11) 0.1667(17) 0.144(9) Uani 1 1 d DU . .
H33A H 0.0331 0.5199 0.1824 0.173 Uiso 1 1 calc R . .
H33B H 0.1036 0.5241 0.1673 0.173 Uiso 1 1 calc R . .
C34 C 0.063(2) 0.4772(13) 0.066(2) 0.191(13) Uani 1 1 d DU . .
H34A H 0.0262 0.4557 0.0617 0.229 Uiso 1 1 calc R . .
H34B H 0.0975 0.4557 0.0496 0.229 Uiso 1 1 calc R . .
C35 C 0.0580(17) 0.5252(16) -0.001(2) 0.176(15) Uani 1 1 d DU . .
H35A H 0.0696 0.5572 0.0326 0.212 Uiso 1 1 calc R . .
H35B H 0.0839 0.5209 -0.0568 0.212 Uiso 1 1 calc R . .
C36 C -0.0083(17) 0.527(2) -0.030(3) 0.20(2) Uani 1 1 d DU . .
H36A H -0.0161 0.5589 -0.0649 0.238 Uiso 1 1 calc R . .
H36B H -0.0333 0.5261 0.0267 0.238 Uiso 1 1 calc R . .
H36C H -0.0175 0.4972 -0.0698 0.238 Uiso 1 1 calc R . .
C37 C 0.2449(8) 0.6622(9) 0.6079(12) 0.064(5) Uani 1 1 d DU . .
H37A H 0.2809 0.6527 0.6443 0.076 Uiso 1 1 calc R . .
H37B H 0.2223 0.6875 0.6461 0.076 Uiso 1 1 calc R . .
C38 C 0.2063(9) 0.6137(8) 0.5952(16) 0.078(6) Uani 1 1 d DU . .
H38A H 0.1969 0.5990 0.6572 0.094 Uiso 1 1 calc R . .
H38B H 0.2281 0.5882 0.5576 0.094 Uiso 1 1 calc R . .
H38C H 0.1692 0.6229 0.5629 0.094 Uiso 1 1 calc R . .
C39 C 0.2118(9) 0.7099(8) 0.4591(13) 0.064(5) Uani 1 1 d U . .
H39A H 0.2269 0.7209 0.3967 0.076 Uiso 1 1 calc R . .
H39B H 0.1842 0.6807 0.4479 0.076 Uiso 1 1 calc R . .
C40 C 0.1757(11) 0.7535(10) 0.4983(18) 0.092(8) Uani 1 1 d U . .
H40A H 0.1437 0.7622 0.4542 0.111 Uiso 1 1 calc R . .
H40B H 0.2014 0.7836 0.5075 0.111 Uiso 1 1 calc R . .
H40C H 0.1585 0.7432 0.5589 0.111 Uiso 1 1 calc R . .
C41 C 0.3055(9) 0.7344(8) 0.5508(14) 0.058(4) Uani 1 1 d U . .
H41A H 0.2821 0.7571 0.5929 0.069 Uiso 1 1 calc R . .
H41B H 0.3391 0.7201 0.5878 0.069 Uiso 1 1 calc R . .
C42 C 0.3302(12) 0.7663(11) 0.4688(18) 0.099(9) Uani 1 1 d U . .
H42A H 0.3563 0.7935 0.4934 0.119 Uiso 1 1 calc R . .
H42B H 0.2972 0.7820 0.4340 0.119 Uiso 1 1 calc R . .
H42C H 0.3530 0.7439 0.4265 0.119 Uiso 1 1 calc R . .
C43 C 0.2995(9) 0.6510(7) 0.4560(11) 0.052(4) Uani 1 1 d U . .
H43A H 0.3120 0.6689 0.3977 0.063 Uiso 1 1 calc R . .
H43B H 0.2718 0.6231 0.4372 0.063 Uiso 1 1 calc R . .
C44 C 0.3548(11) 0.6259(11) 0.4996(15) 0.088(8) Uani 1 1 d U . .
H44A H 0.3739 0.6036 0.4528 0.106 Uiso 1 1 calc R . .
H44B H 0.3430 0.6053 0.5544 0.106 Uiso 1 1 calc R . .
H44C H 0.3828 0.6528 0.5194 0.106 Uiso 1 1 calc R . .
O1 O 1.1116(8) 0.2760(6) 0.2092(11) 0.043(3) Uani 1 1 d U . .
O2 O 1.0246(8) 0.2195(6) 0.3085(11) 0.038(3) Uani 1 1 d U . .
O3 O 1.1170(3) 0.1694(7) 0.2306(5) 0.0331(16) Uani 1 1 d U . .
O4 O 1.0229(8) 0.1200(6) 0.3120(10) 0.034(3) Uani 1 1 d U . .
O5 O 1.1052(9) 0.0612(6) 0.2125(10) 0.042(3) Uani 1 1 d U . .
O6 O 1.1033(8) 0.0578(5) 0.4114(11) 0.036(3) Uani 1 1 d U . .
O7 O 1.1240(10) -0.0319(6) 0.5213(11) 0.047(4) Uani 1 1 d U . .
O8 O 1.0908(8) 0.0605(5) 0.6100(10) 0.032(2) Uani 1 1 d U . .
O9 O 1.0660(9) 0.0655(7) 0.8069(12) 0.051(4) Uani 1 1 d U . .
O10 O 0.9967(7) 0.1230(6) 0.6774(11) 0.036(3) Uani 1 1 d U . .
O11 O 1.0782(3) 0.1746(7) 0.7879(5) 0.0331(16) Uani 1 1 d U . .
O12 O 0.9981(7) 0.2221(6) 0.6754(11) 0.037(3) Uani 1 1 d U . .
O13 O 1.0642(9) 0.2809(6) 0.8014(11) 0.044(4) Uani 1 1 d U . .

```
O14 O 1.0909(7) 0.2819(5) 0.6056(10) 0.030(2) Uani 1 1 d U . .
O15 O 1.1308(9) 0.3759(6) 0.5074(10) 0.038(3) Uani 1 1 d U . .
O16 O 1.1055(7) 0.2808(5) 0.4101(10) 0.028(2) Uani 1 1 d U . .
O17 O 1.1110(3) 0.1714(7) 0.4127(4) 0.0237(13) Uani 1 1 d U . .
O18 O 1.0969(3) 0.1721(7) 0.6086(5) 0.0239(13) Uani 1 1 d U . .
O19 O 1.1846(6) 0.2228(5) 0.5230(8) 0.0230(19) Uani 1 1 d U . .
O20 O 1.1845(6) 0.1173(6) 0.5283(8) 0.0226(18) Uani 1 1 d U . .
O21 O 1.1987(8) 0.2330(5) 0.3234(10) 0.033(2) Uani 1 1 d U . .
O22 O 1.1971(8) 0.1060(6) 0.3204(9) 0.033(3) Uani 1 1 d U . .
O23 O 1.2175(7) 0.0312(5) 0.4438(11) 0.035(2) Uani 1 1 d U . .
O24 O 1.2047(7) 0.0336(5) 0.6247(10) 0.033(2) Uani 1 1 d U . .
O25 O 1.1684(7) 0.1088(5) 0.7291(9) 0.026(2) Uani 1 1 d U . .
O26 O 1.1688(7) 0.2360(5) 0.7276(9) 0.032(2) Uani 1 1 d U . .
O27 O 1.2075(7) 0.3112(5) 0.6187(10) 0.032(2) Uani 1 1 d U . .
O28 O 1.2205(7) 0.3087(6) 0.4351(10) 0.034(2) Uani 1 1 d U . .
O29 O 1.3229(8) 0.2632(6) 0.3469(11) 0.044(3) Uani 1 1 d U . .
O30 O 1.2744(3) 0.1713(8) 0.4165(5) 0.0334(15) Uani 1 1 d U . .
O31 O 1.3181(8) 0.0724(6) 0.3530(12) 0.049(4) Uani 1 1 d U . .
O32 O 1.2951(7) 0.0906(6) 0.5485(10) 0.032(2) Uani 1 1 d U . .
O33 O 1.2927(8) 0.0748(6) 0.7469(12) 0.045(3) Uani 1 1 d U . .
O34 O 1.2570(3) 0.1730(7) 0.6648(5) 0.0315(16) Uani 1 1 d U . .
O35 O 1.2908(8) 0.2672(6) 0.7419(12) 0.039(3) Uani 1 1 d U . .
O36 O 1.2959(7) 0.2501(6) 0.5415(11) 0.037(3) Uani 1 1 d U . .
O37 O 0.9382(4) 0.1730(10) 0.3934(7) 0.058(2) Uani 1 1 d U . .
O38 O 0.9284(4) 0.1720(10) 0.5639(6) 0.056(2) Uani 1 1 d U . .
Si1 Si 1.14202(11) 0.1714(3) 0.51787(19) 0.0188(5) Uani 1 1 d U . .
P1 P 0.98343(14) 0.1715(3) 0.3121(2) 0.0377(7) Uani 1 1 d U . .
P2 P 0.95868(13) 0.1735(3) 0.6607(2) 0.0353(7) Uani 1 1 d U . .
W1 W 1.11379(5) 0.23454(3) 0.30243(7) 0.0298(3) Uani 1 1 d U . .
W2 W 1.11279(6) 0.10583(3) 0.30533(7) 0.0314(3) Uani 1 1 d U . .
W3 W 1.14508(5) 0.03237(4) 0.52284(6) 0.0311(2) Uani 1 1 d U . .
W4 W 1.08385(5) 0.10956(3) 0.71926(7) 0.0281(2) Uani 1 1 d U . .
W5 W 1.08350(5) 0.23811(3) 0.71312(6) 0.0290(2) Uani 1 1 d U . .
W6 W 1.14868(5) 0.31062(4) 0.51401(6) 0.0281(2) Uani 1 1 d U . .
W7 W 1.26214(5) 0.24344(4) 0.41621(7) 0.0320(2) Uani 1 1 d U . .
W8 W 1.26051(5) 0.09544(4) 0.42039(7) 0.0334(3) Uani 1 1 d U . .
W9 W 1.24351(5) 0.09673(4) 0.65903(7) 0.0291(2) Uani 1 1 d U . .
W10 W 1.24380(5) 0.24471(4) 0.65498(7) 0.0286(2) Uani 1 1 d U . .
N1 N 0.3424(10) 0.4148(8) 0.6598(15) 0.077(4) Uani 1 1 d U . .
N2 N 0.0794(10) 0.4574(7) 0.2444(16) 0.113(5) Uani 1 1 d DU . .
N3 N 0.2650(6) 0.6890(5) 0.5156(9) 0.047(3) Uani 1 1 d U . .

loop_
 _atom_site_aniso_label
 _atom_site_aniso_U_11
 _atom_site_aniso_U_22
 _atom_site_aniso_U_33
 _atom_site_aniso_U_23
 _atom_site_aniso_U_13
 _atom_site_aniso_U_12
C1 0.048(6) 0.068(7) 0.062(5) 0.001(8) -0.028(5) 0.003(8)
C2 0.104(9) 0.089(10) 0.056(6) -0.011(9) -0.020(6) -0.002(9)
C3 0.025(6) 0.072(10) 0.063(6) 0.008(18) 0.013(5) 0.003(12)
C4 0.063(10) 0.083(13) 0.054(6) -0.007(18) 0.020(7) -0.01(2)
C5 0.097(13) 0.068(13) 0.109(17) -0.049(12) 0.032(13) -0.052(12)
C6 0.090(18) 0.14(2) 0.28(4) -0.14(2) 0.015(19) 0.004(17)
C7 0.121(19) 0.12(2) 0.32(4) -0.07(2) 0.07(3) -0.01(2)
C8 0.22(2) 0.22(2) 0.22(2) 0.004(10) 0.013(10) -0.003(10)
C9 0.093(15) 0.057(13) 0.103(15) -0.027(8) 0.025(10) -0.054(13)
C10 0.143(16) 0.12(2) 0.095(17) -0.050(11) -0.027(14) 0.053(18)
C11 0.158(19) 0.21(3) 0.12(2) -0.05(2) -0.015(10) -0.03(2)
C12 0.164(15) 0.176(17) 0.175(17) -0.005(10) 0.002(9) 0.007(10)
C13 0.071(15) 0.057(10) 0.131(17) -0.005(10) 0.013(10) -0.022(11)
C14 0.11(2) 0.11(2) 0.13(2) -0.018(15) -0.021(12) 0.003(18)
C15 0.17(3) 0.10(2) 0.21(3) 0.04(2) -0.07(2) 0.00(2)
C16 0.22(3) 0.21(3) 0.19(3) 0.13(3) -0.01(2) -0.02(3)
```

C17 0.070(11) 0.052(9) 0.074(13) -0.015(8) -0.004(9) -0.028(9)
C18 0.108(17) 0.085(15) 0.15(2) -0.037(16) 0.054(17) -0.037(14)
C19 0.058(13) 0.051(11) 0.116(19) 0.001(11) -0.007(11) -0.011(10)
C20 0.17(4) 0.067(19) 0.42(7) -0.04(3) 0.22(5) -0.01(2)
C21 0.15(2) 0.14(3) 0.36(5) 0.07(2) 0.04(3) 0.08(2)
C22 0.14(3) 0.13(3) 0.34(5) 0.07(3) 0.02(3) 0.04(2)
C23 0.18(3) 0.17(3) 0.20(3) 0.04(2) 0.01(2) 0.06(2)
C24 0.15(3) 0.20(3) 0.24(3) 0.06(3) -0.02(3) 0.05(2)
C25 0.133(16) 0.20(2) 0.19(3) -0.045(16) 0.01(2) -0.039(16)
C26 0.18(2) 0.19(3) 0.22(3) -0.025(19) 0.00(2) -0.03(2)
C27 0.15(2) 0.22(3) 0.22(2) 0.010(19) 0.04(2) -0.010(18)
C28 0.210(18) 0.220(18) 0.223(17) 0.006(10) 0.013(10) -0.011(10)
C29 0.159(13) 0.144(12) 0.154(9) -0.003(8) -0.005(9) -0.019(9)
C30 0.177(14) 0.165(13) 0.163(10) -0.004(9) 0.004(9) 0.000(10)
C31 0.25(3) 0.15(2) 0.184(17) -0.018(17) -0.08(3) -0.05(2)
C32 0.24(4) 0.17(3) 0.173(16) -0.014(19) -0.01(3) -0.05(3)
C33 0.15(2) 0.132(18) 0.150(11) -0.002(13) -0.037(18) 0.057(15)
C34 0.20(2) 0.20(3) 0.166(14) -0.018(15) -0.04(2) 0.00(2)
C35 0.18(2) 0.21(3) 0.141(18) -0.022(19) -0.10(3) -0.02(3)
C36 0.14(2) 0.22(4) 0.23(3) 0.00(3) -0.03(2) 0.00(3)
C37 0.063(10) 0.078(15) 0.050(8) 0.008(9) 0.012(7) 0.003(10)
C38 0.066(14) 0.079(13) 0.090(16) 0.038(11) 0.032(12) -0.001(10)
C39 0.059(10) 0.084(14) 0.048(10) -0.015(8) -0.018(8) -0.005(8)
C40 0.077(16) 0.093(18) 0.11(2) -0.014(14) -0.005(14) 0.015(11)
C41 0.050(10) 0.064(11) 0.058(11) -0.013(8) -0.012(9) -0.011(8)
C42 0.089(18) 0.097(19) 0.112(19) 0.002(14) 0.018(15) -0.057(16)
C43 0.072(11) 0.056(10) 0.029(8) 0.000(6) -0.002(7) -0.001(7)
C44 0.088(17) 0.13(2) 0.050(13) -0.004(13) 0.000(12) 0.041(14)
O1 0.051(8) 0.033(6) 0.045(6) 0.008(5) -0.004(6) 0.018(6)
O2 0.036(5) 0.034(5) 0.044(8) -0.001(5) -0.009(5) 0.011(5)
O3 0.043(4) 0.026(3) 0.030(4) -0.003(4) -0.001(3) 0.004(6)
O4 0.035(5) 0.028(5) 0.038(7) 0.002(5) -0.009(5) -0.001(5)
O5 0.055(7) 0.040(5) 0.032(5) -0.004(4) -0.011(5) -0.002(5)
O6 0.044(7) 0.022(5) 0.041(5) 0.001(4) -0.006(5) -0.004(6)
O7 0.061(10) 0.022(5) 0.060(9) -0.003(5) -0.008(7) -0.003(5)
O8 0.029(5) 0.025(4) 0.043(5) 0.002(4) -0.007(4) -0.006(4)
O9 0.051(10) 0.053(7) 0.048(7) 0.024(6) -0.010(7) -0.018(8)
O10 0.026(5) 0.035(5) 0.048(8) 0.007(5) -0.001(5) 0.000(5)
O11 0.027(4) 0.038(4) 0.034(4) 0.000(4) 0.005(3) 0.008(6)
O12 0.022(5) 0.039(5) 0.049(8) 0.015(6) 0.001(5) 0.004(5)
O13 0.046(9) 0.042(6) 0.044(7) -0.007(5) 0.022(7) -0.003(7)
O14 0.024(5) 0.026(4) 0.040(5) -0.008(4) 0.007(4) 0.006(4)
O15 0.044(8) 0.023(5) 0.046(8) 0.004(4) -0.005(6) 0.005(5)
O16 0.028(6) 0.017(5) 0.039(5) 0.002(4) 0.006(4) 0.003(5)
O17 0.030(4) 0.015(3) 0.026(3) -0.003(4) -0.001(3) 0.006(6)
O18 0.022(3) 0.021(3) 0.028(3) 0.002(4) 0.002(3) -0.002(6)
O19 0.019(5) 0.018(4) 0.032(5) 0.001(3) 0.004(3) 0.002(4)
O20 0.023(5) 0.020(4) 0.025(4) 0.000(3) -0.004(3) 0.001(4)
O21 0.034(4) 0.027(6) 0.039(5) 0.004(4) -0.001(4) 0.008(4)
O22 0.034(5) 0.039(7) 0.025(5) -0.007(4) 0.003(4) 0.011(5)
O23 0.040(6) 0.017(4) 0.049(6) -0.009(4) -0.006(5) 0.007(4)
O24 0.029(6) 0.020(5) 0.049(6) 0.003(4) -0.006(5) 0.010(5)
O25 0.027(4) 0.019(6) 0.033(5) 0.002(4) -0.003(4) 0.002(4)
O26 0.029(4) 0.031(7) 0.035(6) -0.008(5) 0.002(4) -0.002(5)
O27 0.032(6) 0.029(5) 0.034(6) -0.002(4) -0.003(5) 0.001(5)
O28 0.033(5) 0.031(4) 0.039(5) 0.005(4) 0.011(4) -0.008(4)
O29 0.038(7) 0.037(7) 0.058(7) 0.013(6) 0.020(6) 0.003(6)
O30 0.020(3) 0.037(3) 0.043(4) 0.005(5) 0.007(3) 0.003(5)
O31 0.041(7) 0.050(8) 0.056(7) 0.002(6) 0.010(6) 0.014(6)
O32 0.024(5) 0.027(6) 0.045(5) -0.001(5) -0.005(4) 0.009(5)
O33 0.039(6) 0.041(6) 0.054(6) 0.014(5) -0.012(5) 0.006(6)
O34 0.027(4) 0.029(3) 0.039(4) -0.001(5) -0.012(3) -0.002(5)
O35 0.033(7) 0.030(6) 0.055(6) -0.003(5) -0.008(5) -0.002(6)
O36 0.026(5) 0.038(6) 0.047(4) -0.004(4) 0.008(4) -0.002(5)
O37 0.049(5) 0.063(6) 0.063(5) 0.002(12) 0.017(4) 0.006(10)
O38 0.048(5) 0.073(7) 0.045(4) 0.000(11) -0.014(4) 0.012(12)

```
Si1 0.0141(12) 0.0196(12) 0.0226(12) -0.001(2) 0.0011(11) -0.001(3)
P1 0.0333(15) 0.0446(17) 0.0352(16) 0.002(3) -0.0110(13) 0.005(4)
P2 0.0227(14) 0.0428(19) 0.0405(16) -0.003(3) -0.0001(13) 0.003(3)
W1 0.0359(7) 0.0256(5) 0.0279(5) 0.0012(3) -0.0012(4) 0.0036(5)
W2 0.0387(7) 0.0252(5) 0.0303(5) -0.0058(3) -0.0033(5) 0.0021(5)
W3 0.0357(6) 0.0184(4) 0.0392(5) -0.0005(3) -0.0034(4) -0.0010(4)
W4 0.0241(6) 0.0286(4) 0.0317(4) 0.0052(3) 0.0003(4) -0.0032(4)
W5 0.0268(6) 0.0289(4) 0.0311(4) -0.0037(3) 0.0028(4) 0.0022(4)
W6 0.0317(5) 0.0176(4) 0.0349(5) -0.0004(3) -0.0024(4) 0.0021(4)
W7 0.0256(6) 0.0282(4) 0.0423(5) 0.0039(4) 0.0079(4) -0.0010(5)
W8 0.0297(6) 0.0287(4) 0.0418(5) -0.0016(4) 0.0065(5) 0.0088(5)
W9 0.0230(6) 0.0258(4) 0.0386(5) 0.0035(4) -0.0053(4) 0.0016(5)
W10 0.0230(6) 0.0237(4) 0.0389(5) -0.0004(4) -0.0066(4) -0.0056(5)
N1 0.087(8) 0.061(7) 0.084(8) -0.012(6) 0.010(6) -0.017(7)
N2 0.103(12) 0.047(10) 0.190(12) -0.016(8) -0.072(13) 0.020(8)
N3 0.044(7) 0.058(8) 0.038(7) -0.009(5) 0.008(5) -0.015(5)

_geom_special_details
;
 All esds (except the esd in the dihedral angle between two l.s.
planes)
 are estimated using the full covariance matrix.  The cell esds are
taken
 into account individually in the estimation of esds in distances,
angles
 and torsion angles; correlations between esds in cell parameters are
only
 used when they are defined by crystal symmetry.  An approximate
(isotropic)
 treatment of cell esds is used for estimating esds involving l.s.
planes.
;

loop_
 _geom_bond_atom_site_label_1
 _geom_bond_atom_site_label_2
 _geom_bond_distance
 _geom_bond_site_symmetry_2
 _geom_bond_publ_flag
C1 C2 1.49(2) . ?
C1 P1 1.819(13) . ?
C1 H1A 0.9700 . ?
C1 H1B 0.9700 . ?
C2 H2A 0.9600 . ?
C2 H2B 0.9600 . ?
C2 H2C 0.9600 . ?
C3 C4 1.52(2) . ?
C3 P2 1.776(12) . ?
C3 H3A 0.9700 . ?
C3 H3B 0.9700 . ?
C4 H4A 0.9600 . ?
C4 H4B 0.9600 . ?
C4 H4C 0.9600 . ?
C5 C6 1.50(2) . ?
C5 N1 1.52(3) . ?
C5 H5A 0.9700 . ?
C5 H5B 0.9700 . ?
C6 C7 1.52(2) . ?
C6 H6A 0.9700 . ?
C6 H6B 0.9700 . ?
C7 C8 1.42(3) . ?
C7 H7A 0.9700 . ?
C7 H7B 0.9700 . ?
C8 H8A 0.9600 . ?
C8 H8B 0.9600 . ?
C8 H8C 0.9600 . ?
```

C9 N1 1.45(3) . ?
C9 C10 1.56(2) . ?
C9 H9A 0.9700 . ?
C9 H9B 0.9700 . ?
C10 C11 1.53(2) . ?
C10 H10A 0.9700 . ?
C10 H10B 0.9700 . ?
C11 C12 1.49(2) . ?
C11 H11A 0.9700 . ?
C11 H11B 0.9700 . ?
C12 H12A 0.9600 . ?
C12 H12B 0.9600 . ?
C12 H12C 0.9600 . ?
C13 N1 1.49(3) . ?
C13 C14 1.56(2) . ?
C13 H13A 0.9700 . ?
C13 H13B 0.9700 . ?
C14 C15 1.52(3) . ?
C14 H14A 0.9700 . ?
C14 H14B 0.9700 . ?
C15 C16 1.55(3) . ?
C15 H15A 0.9700 . ?
C15 H15B 0.9700 . ?
C16 H16A 0.9600 . ?
C16 H16B 0.9600 . ?
C16 H16C 0.9600 . ?
C17 C18 1.53(2) . ?
C17 N1 1.54(3) . ?
C17 H17A 0.9700 . ?
C17 H17B 0.9700 . ?
C18 C19 1.48(2) . ?
C18 H18A 0.9700 . ?
C18 H18B 0.9700 . ?
C19 C20 1.46(2) . ?
C19 H19A 0.9700 . ?
C19 H19B 0.9700 . ?
C20 H20A 0.9600 . ?
C20 H20B 0.9600 . ?
C20 H20C 0.9600 . ?
C21 C22 1.46(3) . ?
C21 N2 1.48(4) . ?
C21 H21A 0.9700 . ?
C21 H21B 0.9700 . ?
C22 C23 1.48(3) . ?
C22 H22A 0.9700 . ?
C22 H22B 0.9700 . ?
C23 C24 1.47(3) . ?
C23 H23A 0.9700 . ?
C23 H23B 0.9700 . ?
C24 H24A 0.9600 . ?
C24 H24B 0.9600 . ?
C24 H24C 0.9600 . ?
C25 N2 1.45(3) . ?
C25 C26 1.47(3) . ?
C25 H25A 0.9700 . ?
C25 H25B 0.9700 . ?
C26 C27 1.57(3) . ?
C26 H26A 0.9700 . ?
C26 H26B 0.9700 . ?
C27 C28 1.55(3) . ?
C27 H27A 0.9700 . ?
C27 H27B 0.9700 . ?
C28 H28A 0.9600 . ?
C28 H28B 0.9600 . ?
C28 H28C 0.9600 . ?
C29 C30 1.43(2) . ?

```
C29 N2 1.58(2) . ?
C29 H29A 0.9700 . ?
C29 H29B 0.9700 . ?
C30 C31 1.48(3) . ?
C30 H30A 0.9700 . ?
C30 H30B 0.9700 . ?
C31 C32 1.532(18) . ?
C31 H31A 0.9700 . ?
C31 H31B 0.9700 . ?
C32 H32A 0.9600 . ?
C32 H32B 0.9600 . ?
C32 H32C 0.9600 . ?
C33 C34 1.520(19) . ?
C33 N2 1.54(2) . ?
C33 H33A 0.9700 . ?
C33 H33B 0.9700 . ?
C34 C35 1.538(19) . ?
C34 H34A 0.9700 . ?
C34 H34B 0.9700 . ?
C35 C36 1.513(19) . ?
C35 H35A 0.9700 . ?
C35 H35B 0.9700 . ?
C36 H36A 0.9600 . ?
C36 H36B 0.9600 . ?
C36 H36C 0.9600 . ?
C37 C38 1.509(17) . ?
C37 N3 1.52(2) . ?
C37 H37A 0.9700 . ?
C37 H37B 0.9700 . ?
C38 H38A 0.9600 . ?
C38 H38B 0.9600 . ?
C38 H38C 0.9600 . ?
C39 C40 1.47(3) . ?
C39 N3 1.51(2) . ?
C39 H39A 0.9700 . ?
C39 H39B 0.9700 . ?
C40 H40A 0.9600 . ?
C40 H40B 0.9600 . ?
C40 H40C 0.9600 . ?
C41 C42 1.50(3) . ?
C41 N3 1.54(2) . ?
C41 H41A 0.9700 . ?
C41 H41B 0.9700 . ?
C42 H42A 0.9600 . ?
C42 H42B 0.9600 . ?
C42 H42C 0.9600 . ?
C43 N3 1.48(2) . ?
C43 C44 1.50(3) . ?
C43 H43A 0.9700 . ?
C43 H43B 0.9700 . ?
C44 H44A 0.9600 . ?
C44 H44B 0.9600 . ?
C44 H44C 0.9600 . ?
O1 W1 1.669(15) . ?
O2 P1 1.519(18) . ?
O2 W1 1.999(18) . ?
O3 W2 1.922(16) . ?
O3 W1 1.933(16) . ?
O4 P1 1.571(17) . ?
O4 W2 2.011(18) . ?
O5 W2 1.725(14) . ?
O6 W3 1.914(15) . ?
O6 W2 1.923(14) . ?
O7 W3 1.697(16) . ?
O8 W3 1.844(16) . ?
O8 W4 1.971(14) . ?
```

```
O9 W4 1.700(15) . ?
O10 P2 1.548(17) . ?
O10 W4 2.032(16) . ?
O11 W4 1.912(17) . ?
O11 W5 1.922(16) . ?
O12 P2 1.522(18) . ?
O12 W5 1.992(16) . ?
O13 W5 1.694(15) . ?
O14 W5 1.870(14) . ?
O14 W6 1.941(15) . ?
O15 W6 1.706(15) . ?
O16 W6 1.888(15) . ?
O16 W1 1.911(14) . ?
O17 Si1 1.614(7) . ?
O17 W1 2.219(13) . ?
O17 W2 2.236(13) . ?
O18 Si1 1.604(7) . ?
O18 W4 2.229(13) . ?
O18 W5 2.239(13) . ?
O19 Si1 1.608(15) . ?
O19 W10 2.317(13) . ?
O19 W7 2.321(13) . ?
O19 W6 2.369(14) . ?
O20 Si1 1.668(15) . ?
O20 W9 2.294(12) . ?
O20 W8 2.313(13) . ?
O20 W3 2.326(14) . ?
O21 W1 1.889(17) . ?
O21 W7 1.919(16) . ?
O22 W2 1.867(17) . ?
O22 W8 1.986(15) . ?
O23 W8 1.913(15) . ?
O23 W3 1.935(16) . ?
O24 W9 1.878(15) . ?
O24 W3 1.929(15) . ?
O25 W4 1.865(15) . ?
O25 W9 1.942(15) . ?
O26 W5 1.886(16) . ?
O26 W10 1.946(15) . ?
O27 W10 1.935(14) . ?
O27 W6 1.946(14) . ?
O28 W7 1.911(15) . ?
O28 W6 1.924(14) . ?
O29 W7 1.722(15) . ?
O30 W7 1.85(2) . ?
O30 W8 1.95(2) . ?
O31 W8 1.680(16) . ?
O32 W9 1.916(15) . ?
O32 W8 1.940(14) . ?
O33 W9 1.724(16) . ?
O34 W10 1.850(18) . ?
O34 W9 1.961(18) . ?
O35 W10 1.690(16) . ?
O36 W7 1.901(15) . ?
O36 W10 1.954(15) . ?
O37 P1 1.506(9) . ?
O38 P2 1.502(9) . ?

loop_
 _geom_angle_atom_site_label_1
 _geom_angle_atom_site_label_2
 _geom_angle_atom_site_label_3
 _geom_angle
 _geom_angle_site_symmetry_1
 _geom_angle_site_symmetry_3
 _geom_angle_publ_flag
```

```
C2 C1 P1 113.3(11) . . ?
C2 C1 H1A 108.9 . . ?
P1 C1 H1A 108.9 . . ?
C2 C1 H1B 108.9 . . ?
P1 C1 H1B 108.9 . . ?
H1A C1 H1B 107.7 . . ?
C1 C2 H2A 109.5 . . ?
C1 C2 H2B 109.4 . . ?
H2A C2 H2B 109.5 . . ?
C1 C2 H2C 109.5 . . ?
H2A C2 H2C 109.5 . . ?
H2B C2 H2C 109.5 . . ?
C4 C3 P2 115.3(10) . . ?
C4 C3 H3A 108.4 . . ?
P2 C3 H3A 108.4 . . ?
C4 C3 H3B 108.5 . . ?
P2 C3 H3B 108.5 . . ?
H3A C3 H3B 107.5 . . ?
C3 C4 H4A 109.5 . . ?
C3 C4 H4B 109.5 . . ?
H4A C4 H4B 109.5 . . ?
C3 C4 H4C 109.5 . . ?
H4A C4 H4C 109.5 . . ?
H4B C4 H4C 109.5 . . ?
C6 C5 N1 112.9(19) . . ?
C6 C5 H5A 109.0 . . ?
N1 C5 H5A 109.0 . . ?
C6 C5 H5B 109.0 . . ?
N1 C5 H5B 109.0 . . ?
H5A C5 H5B 107.8 . . ?
C5 C6 C7 114(2) . . ?
C5 C6 H6A 108.8 . . ?
C7 C6 H6A 108.8 . . ?
C5 C6 H6B 108.8 . . ?
C7 C6 H6B 108.8 . . ?
H6A C6 H6B 107.7 . . ?
C8 C7 C6 115(3) . . ?
C8 C7 H7A 108.7 . . ?
C6 C7 H7A 108.5 . . ?
C8 C7 H7B 108.2 . . ?
C6 C7 H7B 108.4 . . ?
H7A C7 H7B 107.5 . . ?
C7 C8 H8A 109.3 . . ?
C7 C8 H8B 109.3 . . ?
H8A C8 H8B 109.5 . . ?
C7 C8 H8C 109.7 . . ?
H8A C8 H8C 109.5 . . ?
H8B C8 H8C 109.5 . . ?
N1 C9 C10 112.9(17) . . ?
N1 C9 H9A 109.0 . . ?
C10 C9 H9A 109.0 . . ?
N1 C9 H9B 109.0 . . ?
C10 C9 H9B 109.0 . . ?
H9A C9 H9B 107.8 . . ?
C11 C10 C9 110(2) . . ?
C11 C10 H10A 109.6 . . ?
C9 C10 H10A 109.6 . . ?
C11 C10 H10B 109.6 . . ?
C9 C10 H10B 109.6 . . ?
H10A C10 H10B 108.1 . . ?
C12 C11 C10 118(2) . . ?
C12 C11 H11A 107.9 . . ?
C10 C11 H11A 107.9 . . ?
C12 C11 H11B 107.9 . . ?
C10 C11 H11B 107.9 . . ?
H11A C11 H11B 107.2 . . ?
```

```
C11 C12 H12A 109.5 . . ?
C11 C12 H12B 109.5 . . ?
H12A C12 H12B 109.5 . . ?
C11 C12 H12C 109.5 . . ?
H12A C12 H12C 109.5 . . ?
H12B C12 H12C 109.5 . . ?
N1 C13 C14 117.3(19) . . ?
N1 C13 H13A 108.0 . . ?
C14 C13 H13A 108.0 . . ?
N1 C13 H13B 108.0 . . ?
C14 C13 H13B 108.0 . . ?
H13A C13 H13B 107.2 . . ?
C15 C14 C13 110(3) . . ?
C15 C14 H14A 109.7 . . ?
C13 C14 H14A 109.7 . . ?
C15 C14 H14B 109.6 . . ?
C13 C14 H14B 109.7 . . ?
H14A C14 H14B 108.2 . . ?
C14 C15 C16 116(3) . . ?
C14 C15 H15A 108.2 . . ?
C16 C15 H15A 108.2 . . ?
C14 C15 H15B 108.2 . . ?
C16 C15 H15B 108.2 . . ?
H15A C15 H15B 107.3 . . ?
C15 C16 H16A 109.5 . . ?
C15 C16 H16B 109.5 . . ?
H16A C16 H16B 109.5 . . ?
C15 C16 H16C 109.5 . . ?
H16A C16 H16C 109.5 . . ?
H16B C16 H16C 109.5 . . ?
C18 C17 N1 116.5(16) . . ?
C18 C17 H17A 108.1 . . ?
N1 C17 H17A 108.2 . . ?
C18 C17 H17B 108.2 . . ?
N1 C17 H17B 108.2 . . ?
H17A C17 H17B 107.3 . . ?
C19 C18 C17 114(2) . . ?
C19 C18 H18A 108.7 . . ?
C17 C18 H18A 108.7 . . ?
C19 C18 H18B 108.7 . . ?
C17 C18 H18B 108.7 . . ?
H18A C18 H18B 107.6 . . ?
C20 C19 C18 109(2) . . ?
C20 C19 H19A 110.0 . . ?
C18 C19 H19A 109.7 . . ?
C20 C19 H19B 109.6 . . ?
C18 C19 H19B 109.8 . . ?
H19A C19 H19B 108.2 . . ?
C19 C20 H20A 109.4 . . ?
C19 C20 H20B 109.3 . . ?
H20A C20 H20B 109.5 . . ?
C19 C20 H20C 109.7 . . ?
H20A C20 H20C 109.5 . . ?
H20B C20 H20C 109.5 . . ?
C22 C21 N2 122(3) . . ?
C22 C21 H21A 106.7 . . ?
N2 C21 H21A 106.7 . . ?
C22 C21 H21B 106.8 . . ?
N2 C21 H21B 106.8 . . ?
H21A C21 H21B 106.6 . . ?
C21 C22 C23 121(3) . . ?
C21 C22 H22A 107.1 . . ?
C23 C22 H22A 107.0 . . ?
C21 C22 H22B 107.0 . . ?
C23 C22 H22B 107.0 . . ?
H22A C22 H22B 106.7 . . ?
```

```
C24 C23 C22 113(3) . . ?
C24 C23 H23A 108.9 . . ?
C22 C23 H23A 109.0 . . ?
C24 C23 H23B 109.0 . . ?
C22 C23 H23B 108.9 . . ?
H23A C23 H23B 107.7 . . ?
C23 C24 H24A 109.5 . . ?
C23 C24 H24B 109.5 . . ?
H24A C24 H24B 109.5 . . ?
C23 C24 H24C 109.5 . . ?
H24A C24 H24C 109.5 . . ?
H24B C24 H24C 109.5 . . ?
N2 C25 C26 116(3) . . ?
N2 C25 H25A 108.4 . . ?
C26 C25 H25A 108.4 . . ?
N2 C25 H25B 108.4 . . ?
C26 C25 H25B 108.4 . . ?
H25A C25 H25B 107.4 . . ?
C25 C26 C27 109(2) . . ?
C25 C26 H26A 109.8 . . ?
C27 C26 H26A 109.8 . . ?
C25 C26 H26B 109.8 . . ?
C27 C26 H26B 109.8 . . ?
H26A C26 H26B 108.3 . . ?
C28 C27 C26 103(2) . . ?
C28 C27 H27A 111.1 . . ?
C26 C27 H27A 111.1 . . ?
C28 C27 H27B 111.1 . . ?
C26 C27 H27B 111.1 . . ?
H27A C27 H27B 109.1 . . ?
C27 C28 H28A 109.5 . . ?
C27 C28 H28B 109.5 . . ?
H28A C28 H28B 109.5 . . ?
C27 C28 H28C 109.4 . . ?
H28A C28 H28C 109.5 . . ?
H28B C28 H28C 109.5 . . ?
C30 C29 N2 132(3) . . ?
C30 C29 H29A 104.2 . . ?
N2 C29 H29A 104.2 . . ?
C30 C29 H29B 104.1 . . ?
N2 C29 H29B 104.2 . . ?
H29A C29 H29B 105.5 . . ?
C29 C30 C31 119(3) . . ?
C29 C30 H30A 107.6 . . ?
C31 C30 H30A 107.6 . . ?
C29 C30 H30B 107.7 . . ?
C31 C30 H30B 107.7 . . ?
H30A C30 H30B 107.1 . . ?
C30 C31 C32 112(2) . . ?
C30 C31 H31A 109.2 . . ?
C32 C31 H31A 109.2 . . ?
C30 C31 H31B 109.3 . . ?
C32 C31 H31B 109.2 . . ?
H31A C31 H31B 107.9 . . ?
C31 C32 H32A 109.5 . . ?
C31 C32 H32B 109.5 . . ?
H32A C32 H32B 109.5 . . ?
C31 C32 H32C 109.5 . . ?
H32A C32 H32C 109.5 . . ?
H32B C32 H32C 109.5 . . ?
C34 C33 N2 113.0(19) . . ?
C34 C33 H33A 109.1 . . ?
N2 C33 H33A 109.0 . . ?
C34 C33 H33B 108.9 . . ?
N2 C33 H33B 109.0 . . ?
H33A C33 H33B 107.8 . . ?
```

```
C33 C34 C35 105(2) . . ?
C33 C34 H34A 110.6 . . ?
C35 C34 H34A 110.7 . . ?
C33 C34 H34B 110.9 . . ?
C35 C34 H34B 110.8 . . ?
H34A C34 H34B 108.8 . . ?
C36 C35 C34 104(2) . . ?
C36 C35 H35A 110.6 . . ?
C34 C35 H35A 110.9 . . ?
C36 C35 H35B 111.2 . . ?
C34 C35 H35B 110.9 . . ?
H35A C35 H35B 108.9 . . ?
C35 C36 H36A 109.5 . . ?
C35 C36 H36B 109.7 . . ?
H36A C36 H36B 109.5 . . ?
C35 C36 H36C 109.2 . . ?
H36A C36 H36C 109.5 . . ?
H36B C36 H36C 109.5 . . ?
C38 C37 N3 115.6(14) . . ?
C38 C37 H37A 108.4 . . ?
N3 C37 H37A 108.4 . . ?
C38 C37 H37B 108.4 . . ?
N3 C37 H37B 108.4 . . ?
H37A C37 H37B 107.4 . . ?
C37 C38 H38A 109.5 . . ?
C37 C38 H38B 109.5 . . ?
H38A C38 H38B 109.5 . . ?
C37 C38 H38C 109.5 . . ?
H38A C38 H38C 109.5 . . ?
H38B C38 H38C 109.5 . . ?
C40 C39 N3 119.5(16) . . ?
C40 C39 H39A 107.5 . . ?
N3 C39 H39A 107.5 . . ?
C40 C39 H39B 107.5 . . ?
N3 C39 H39B 107.5 . . ?
H39A C39 H39B 107.0 . . ?
C39 C40 H40A 109.5 . . ?
C39 C40 H40B 109.5 . . ?
H40A C40 H40B 109.5 . . ?
C39 C40 H40C 109.5 . . ?
H40A C40 H40C 109.5 . . ?
H40B C40 H40C 109.5 . . ?
C42 C41 N3 111.9(16) . . ?
C42 C41 H41A 109.2 . . ?
N3 C41 H41A 109.2 . . ?
C42 C41 H41B 109.2 . . ?
N3 C41 H41B 109.2 . . ?
H41A C41 H41B 107.9 . . ?
C41 C42 H42A 109.5 . . ?
C41 C42 H42B 109.5 . . ?
H42A C42 H42B 109.5 . . ?
C41 C42 H42C 109.5 . . ?
H42A C42 H42C 109.5 . . ?
H42B C42 H42C 109.5 . . ?
N3 C43 C44 117.8(15) . . ?
N3 C43 H43A 107.8 . . ?
C44 C43 H43A 107.8 . . ?
N3 C43 H43B 107.9 . . ?
C44 C43 H43B 107.9 . . ?
H43A C43 H43B 107.2 . . ?
C43 C44 H44A 109.5 . . ?
C43 C44 H44B 109.5 . . ?
H44A C44 H44B 109.5 . . ?
C43 C44 H44C 109.5 . . ?
H44A C44 H44C 109.5 . . ?
H44B C44 H44C 109.5 . . ?
```

```
P1 O2 W1 137.7(10) . . ?
W2 O3 W1 116.0(4) . . ?
P1 O4 W2 133.8(10) . . ?
W3 O6 W2 141.5(9) . . ?
W3 O8 W4 143.2(9) . . ?
P2 O10 W4 133.8(10) . . ?
W4 O11 W5 116.9(4) . . ?
P2 O12 W5 137.5(10) . . ?
W5 O14 W6 143.6(9) . . ?
W6 O16 W1 142.9(9) . . ?
Si1 O17 W1 127.8(8) . . ?
Si1 O17 W2 126.7(8) . . ?
W1 O17 W2 94.4(2) . . ?
Si1 O18 W4 127.9(8) . . ?
Si1 O18 W5 126.8(8) . . ?
W4 O18 W5 93.9(2) . . ?
Si1 O19 W10 123.8(7) . . ?
Si1 O19 W7 125.6(7) . . ?
W10 O19 W7 92.2(5) . . ?
Si1 O19 W6 124.6(8) . . ?
W10 O19 W6 90.2(5) . . ?
W7 O19 W6 89.9(5) . . ?
Si1 O20 W9 125.0(7) . . ?
Si1 O20 W8 123.1(7) . . ?
W9 O20 W8 92.9(5) . . ?
Si1 O20 W3 123.6(8) . . ?
W9 O20 W3 91.5(5) . . ?
W8 O20 W3 91.5(5) . . ?
W1 O21 W7 145.0(8) . . ?
W2 O22 W8 140.8(8) . . ?
W8 O23 W3 119.3(7) . . ?
W9 O24 W3 120.6(7) . . ?
W4 O25 W9 144.4(7) . . ?
W5 O26 W10 141.6(8) . . ?
W10 O27 W6 117.5(7) . . ?
W7 O28 W6 119.6(7) . . ?
W7 O30 W8 162.5(4) . . ?
W9 O32 W8 119.9(8) . . ?
W10 O34 W9 161.1(4) . . ?
W7 O36 W10 120.3(8) . . ?
O18 Si1 O19 108.4(8) . . ?
O18 Si1 O17 116.8(4) . . ?
O19 Si1 O17 106.6(7) . . ?
O18 Si1 O20 106.7(7) . . ?
O19 Si1 O20 109.9(4) . . ?
O17 Si1 O20 108.4(7) . . ?
O37 P1 O2 113.5(12) . . ?
O37 P1 O4 112.7(11) . . ?
O2 P1 O4 109.8(4) . . ?
O37 P1 C1 105.6(6) . . ?
O2 P1 C1 107.1(13) . . ?
O4 P1 C1 107.8(13) . . ?
O38 P2 O12 113.2(12) . . ?
O38 P2 O10 110.7(12) . . ?
O12 P2 O10 110.1(4) . . ?
O38 P2 C3 107.4(6) . . ?
O12 P2 C3 109.2(14) . . ?
O10 P2 C3 105.9(14) . . ?
O1 W1 O21 99.3(7) . . ?
O1 W1 O16 102.6(7) . . ?
O21 W1 O16 89.2(6) . . ?
O1 W1 O3 98.0(6) . . ?
O21 W1 O3 91.5(5) . . ?
O16 W1 O3 159.0(5) . . ?
O1 W1 O2 97.2(8) . . ?
O21 W1 O2 163.3(6) . . ?
```

```
O16 W1 O2 89.4(6) . . ?
O3 W1 O2 83.9(5) . . ?
O1 W1 O17 172.1(6) . . ?
O21 W1 O17 84.6(5) . . ?
O16 W1 O17 84.3(5) . . ?
O3 W1 O17 74.9(5) . . ?
O2 W1 O17 78.7(5) . . ?
O5 W2 O22 100.5(7) . . ?
O5 W2 O3 98.8(6) . . ?
O22 W2 O3 90.6(5) . . ?
O5 W2 O6 98.4(7) . . ?
O22 W2 O6 91.3(7) . . ?
O3 W2 O6 162.0(6) . . ?
O5 W2 O4 93.3(7) . . ?
O22 W2 O4 166.1(6) . . ?
O3 W2 O4 85.5(5) . . ?
O6 W2 O4 88.4(7) . . ?
O5 W2 O17 170.5(6) . . ?
O22 W2 O17 86.6(4) . . ?
O3 W2 O17 74.7(5) . . ?
O6 W2 O17 87.6(5) . . ?
O4 W2 O17 79.5(5) . . ?
O7 W3 O8 101.8(8) . . ?
O7 W3 O6 100.6(7) . . ?
O8 W3 O6 95.2(7) . . ?
O7 W3 O24 102.2(7) . . ?
O8 W3 O24 87.2(7) . . ?
O6 W3 O24 156.1(6) . . ?
O7 W3 O23 101.7(8) . . ?
O8 W3 O23 155.7(6) . . ?
O6 W3 O23 86.6(7) . . ?
O24 W3 O23 81.8(7) . . ?
O7 W3 O20 173.9(8) . . ?
O8 W3 O20 82.0(5) . . ?
O6 W3 O20 83.8(5) . . ?
O24 W3 O20 73.0(5) . . ?
O23 W3 O20 74.1(5) . . ?
O9 W4 O25 99.9(8) . . ?
O9 W4 O11 101.3(7) . . ?
O25 W4 O11 92.1(5) . . ?
O9 W4 O8 98.9(8) . . ?
O25 W4 O8 88.4(6) . . ?
O11 W4 O8 159.4(5) . . ?
O9 W4 O10 95.6(8) . . ?
O25 W4 O10 164.5(6) . . ?
O11 W4 O10 86.3(5) . . ?
O8 W4 O10 87.7(7) . . ?
O9 W4 O18 173.2(7) . . ?
O25 W4 O18 86.0(4) . . ?
O11 W4 O18 74.7(5) . . ?
O8 W4 O18 84.8(5) . . ?
O10 W4 O18 78.7(5) . . ?
O13 W5 O14 102.6(7) . . ?
O13 W5 O26 100.9(8) . . ?
O14 W5 O26 90.9(7) . . ?
O13 W5 O11 97.6(7) . . ?
O14 W5 O11 159.5(5) . . ?
O26 W5 O11 88.8(5) . . ?
O13 W5 O12 94.9(8) . . ?
O14 W5 O12 89.6(7) . . ?
O26 W5 O12 163.6(6) . . ?
O11 W5 O12 85.0(5) . . ?
O13 W5 O18 169.8(6) . . ?
O14 W5 O18 85.2(5) . . ?
O26 W5 O18 85.2(4) . . ?
O11 W5 O18 74.3(5) . . ?
```

```
O12 W5 O18 78.5(5) . . ?
O15 W6 O16 103.5(7) . . ?
O15 W6 O28 100.6(7) . . ?
O16 W6 O28 88.1(6) . . ?
O15 W6 O14 104.4(7) . . ?
O16 W6 O14 91.2(6) . . ?
O28 W6 O14 154.4(6) . . ?
O15 W6 O27 100.7(7) . . ?
O16 W6 O27 155.4(6) . . ?
O28 W6 O27 83.2(7) . . ?
O14 W6 O27 87.0(7) . . ?
O15 W6 O19 173.9(7) . . ?
O16 W6 O19 80.2(5) . . ?
O28 W6 O19 74.5(5) . . ?
O14 W6 O19 80.2(5) . . ?
O27 W6 O19 75.3(5) . . ?
O29 W7 O30 100.2(5) . . ?
O29 W7 O36 100.6(8) . . ?
O30 W7 O36 91.7(6) . . ?
O29 W7 O28 101.2(6) . . ?
O30 W7 O28 158.0(5) . . ?
O36 W7 O28 89.1(7) . . ?
O29 W7 O21 103.2(7) . . ?
O30 W7 O21 88.3(5) . . ?
O36 W7 O21 155.8(7) . . ?
O28 W7 O21 82.2(6) . . ?
O29 W7 O19 173.6(7) . . ?
O30 W7 O19 83.3(4) . . ?
O36 W7 O19 73.8(6) . . ?
O28 W7 O19 75.9(5) . . ?
O21 W7 O19 82.2(6) . . ?
O31 W8 O23 99.8(7) . . ?
O31 W8 O32 101.2(7) . . ?
O23 W8 O32 89.1(7) . . ?
O31 W8 O30 102.1(6) . . ?
O23 W8 O30 157.5(5) . . ?
O32 W8 O30 91.5(5) . . ?
O31 W8 O22 100.7(7) . . ?
O23 W8 O22 83.6(6) . . ?
O32 W8 O22 157.8(6) . . ?
O30 W8 O22 87.5(5) . . ?
O31 W8 O20 171.7(6) . . ?
O23 W8 O20 74.8(6) . . ?
O32 W8 O20 72.8(5) . . ?
O30 W8 O20 84.0(4) . . ?
O22 W8 O20 85.1(5) . . ?
O33 W9 O24 100.9(7) . . ?
O33 W9 O32 99.8(8) . . ?
O24 W9 O32 89.8(7) . . ?
O33 W9 O25 103.3(7) . . ?
O24 W9 O25 82.8(6) . . ?
O32 W9 O25 156.7(6) . . ?
O33 W9 O34 101.3(6) . . ?
O24 W9 O34 157.2(5) . . ?
O32 W9 O34 91.3(5) . . ?
O25 W9 O34 87.3(4) . . ?
O33 W9 O20 171.9(7) . . ?
O24 W9 O20 74.7(5) . . ?
O32 W9 O20 73.7(5) . . ?
O25 W9 O20 83.1(5) . . ?
O34 W9 O20 83.9(4) . . ?
O35 W10 O34 100.6(5) . . ?
O35 W10 O27 98.3(6) . . ?
O34 W10 O27 160.6(5) . . ?
O35 W10 O26 100.7(7) . . ?
O34 W10 O26 89.0(5) . . ?
```

```
O27 W10 O26 83.3(6) . . ?
O35 W10 O36 101.2(8) . . ?
O34 W10 O36 92.1(5) . . ?
O27 W10 O36 88.3(7) . . ?
O26 W10 O36 157.4(6) . . ?
O35 W10 O19 172.3(6) . . ?
O34 W10 O19 84.9(4) . . ?
O27 W10 O19 76.8(5) . . ?
O26 W10 O19 84.7(5) . . ?
O36 W10 O19 73.0(6) . . ?
C9 N1 C13 108.3(17) . . ?
C9 N1 C5 111.5(19) . . ?
C13 N1 C5 112(2) . . ?
C9 N1 C17 109.1(19) . . ?
C13 N1 C17 110.5(18) . . ?
C5 N1 C17 105.1(15) . . ?
C25 N2 C21 115(3) . . ?
C25 N2 C33 102(2) . . ?
C21 N2 C33 117(3) . . ?
C25 N2 C29 100(3) . . ?
C21 N2 C29 124(3) . . ?
C33 N2 C29 95.0(18) . . ?
C43 N3 C39 109.7(13) . . ?
C43 N3 C37 109.2(13) . . ?
C39 N3 C37 111.8(14) . . ?
C43 N3 C41 111.7(13) . . ?
C39 N3 C41 110.7(14) . . ?
C37 N3 C41 103.6(13) . . ?

loop_
 _geom_torsion_atom_site_label_1
 _geom_torsion_atom_site_label_2
 _geom_torsion_atom_site_label_3
 _geom_torsion_atom_site_label_4
 _geom_torsion
 _geom_torsion_site_symmetry_1
 _geom_torsion_site_symmetry_2
 _geom_torsion_site_symmetry_3
 _geom_torsion_site_symmetry_4
 _geom_torsion_publ_flag
N1 C5 C6 C7 160(3) . . . . ?
C5 C6 C7 C8 56(6) . . . . ?
N1 C9 C10 C11 167(2) . . . . ?
C9 C10 C11 C12 -59(4) . . . . ?
N1 C13 C14 C15 -162(3) . . . . ?
C13 C14 C15 C16 72(4) . . . . ?
N1 C17 C18 C19 178(2) . . . . ?
C17 C18 C19 C20 154(3) . . . . ?
N2 C21 C22 C23 -166(4) . . . . ?
C21 C22 C23 C24 -41(8) . . . . ?
N2 C25 C26 C27 177(3) . . . . ?
C25 C26 C27 C28 -170(4) . . . . ?
N2 C29 C30 C31 171(4) . . . . ?
C29 C30 C31 C32 177(4) . . . . ?
N2 C33 C34 C35 -176(3) . . . . ?
C33 C34 C35 C36 -106(4) . . . . ?
W4 O18 Si1 O19 -124.9(8) . . . . ?
W5 O18 Si1 O19 8.9(9) . . . . ?
W4 O18 Si1 O17 114.6(8) . . . . ?
W5 O18 Si1 O17 -111.6(8) . . . . ?
W4 O18 Si1 O20 -6.7(9) . . . . ?
W5 O18 Si1 O20 127.2(8) . . . . ?
W10 O19 Si1 O18 54.9(10) . . . . ?
W7 O19 Si1 O18 177.4(7) . . . . ?
W6 O19 Si1 O18 -63.0(9) . . . . ?
W10 O19 Si1 O17 -178.6(7) . . . . ?
```

```
W7 O19 Si1 O17 -56.0(10) . . . . ?
W6 O19 Si1 O17 63.6(8) . . . . ?
W10 O19 Si1 O20 -61.3(8) . . . . ?
W7 O19 Si1 O20 61.2(8) . . . . ?
W6 O19 Si1 O20 -179.2(8) . . . . ?
W1 O17 Si1 O18 113.0(8) . . . . ?
W2 O17 Si1 O18 -112.5(8) . . . . ?
W1 O17 Si1 O19 -8.4(9) . . . . ?
W2 O17 Si1 O19 126.1(8) . . . . ?
W1 O17 Si1 O20 -126.6(8) . . . . ?
W2 O17 Si1 O20 7.9(9) . . . . ?
W9 O20 Si1 O18 -56.4(10) . . . . ?
W8 O20 Si1 O18 -178.3(7) . . . . ?
W3 O20 Si1 O18 63.7(8) . . . . ?
W9 O20 Si1 O19 61.0(8) . . . . ?
W8 O20 Si1 O19 -61.0(8) . . . . ?
W3 O20 Si1 O19 -178.9(8) . . . . ?
W9 O20 Si1 O17 177.1(7) . . . . ?
W8 O20 Si1 O17 55.2(9) . . . . ?
W3 O20 Si1 O17 -62.8(8) . . . . ?
W1 O2 P1 O37 128.0(13) . . . . ?
W1 O2 P1 O4 0.9(12) . . . . ?
W1 O2 P1 C1 -115.9(15) . . . . ?
W2 O4 P1 O37 -129.2(12) . . . . ?
W2 O4 P1 O2 -1.7(10) . . . . ?
W2 O4 P1 C1 114.7(13) . . . . ?
C2 C1 P1 O37 -176(3) . . . . ?
C2 C1 P1 O2 63(3) . . . . ?
C2 C1 P1 O4 -55(3) . . . . ?
W5 O12 P2 O38 -126.4(13) . . . . ?
W5 O12 P2 O10 -1.9(12) . . . . ?
W5 O12 P2 C3 114.0(15) . . . . ?
W4 O10 P2 O38 129.1(13) . . . . ?
W4 O10 P2 O12 3.2(11) . . . . ?
W4 O10 P2 C3 -114.8(14) . . . . ?
C4 C3 P2 O38 -180(3) . . . . ?
C4 C3 P2 O12 -57(3) . . . . ?
C4 C3 P2 O10 62(3) . . . . ?
W7 O21 W1 O1 124.8(14) . . . . ?
W7 O21 W1 O16 22.2(14) . . . . ?
W7 O21 W1 O3 -136.8(14) . . . . ?
W7 O21 W1 O2 -63(3) . . . . ?
W7 O21 W1 O17 -62.1(13) . . . . ?
W6 O16 W1 O1 -107.9(13) . . . . ?
W6 O16 W1 O21 -8.6(13) . . . . ?
W6 O16 W1 O3 84(2) . . . . ?
W6 O16 W1 O2 154.8(13) . . . . ?
W6 O16 W1 O17 76.1(12) . . . . ?
W2 O3 W1 O1 -174.5(7) . . . . ?
W2 O3 W1 O21 85.9(6) . . . . ?
W2 O3 W1 O16 -5.9(16) . . . . ?
W2 O3 W1 O2 -78.1(6) . . . . ?
W2 O3 W1 O17 1.9(4) . . . . ?
P1 O2 W1 O1 129.1(14) . . . . ?
P1 O2 W1 O21 -43(3) . . . . ?
P1 O2 W1 O16 -128.3(14) . . . . ?
P1 O2 W1 O3 31.7(13) . . . . ?
P1 O2 W1 O17 -44.0(13) . . . . ?
Si1 O17 W1 O1 170(4) . . . . ?
W2 O17 W1 O1 25(5) . . . . ?
Si1 O17 W1 O21 50.5(7) . . . . ?
W2 O17 W1 O21 -94.5(5) . . . . ?
Si1 O17 W1 O16 -39.3(8) . . . . ?
W2 O17 W1 O16 175.8(5) . . . . ?
Si1 O17 W1 O3 143.5(7) . . . . ?
W2 O17 W1 O3 -1.4(3) . . . . ?
```

```
Si1 O17 W1 O2 -129.8(8) . . . . ?
W2 O17 W1 O2 85.2(5) . . . . ?
W8 O22 W2 O5 -125.5(12) . . . . ?
W8 O22 W2 O3 135.4(12) . . . . ?
W8 O22 W2 O6 -26.7(13) . . . . ?
W8 O22 W2 O4 62(3) . . . . ?
W8 O22 W2 O17 60.8(12) . . . . ?
W1 O3 W2 O5 171.2(7) . . . . ?
W1 O3 W2 O22 -88.2(5) . . . . ?
W1 O3 W2 O6 8(2) . . . . ?
W1 O3 W2 O4 78.5(5) . . . . ?
W1 O3 W2 O17 -1.8(4) . . . . ?
W3 O6 W2 O5 120.8(14) . . . . ?
W3 O6 W2 O22 20.0(14) . . . . ?
W3 O6 W2 O3 -76(3) . . . . ?
W3 O6 W2 O4 -146.1(14) . . . . ?
W3 O6 W2 O17 -66.5(13) . . . . ?
P1 O4 W2 O5 -129.1(12) . . . . ?
P1 O4 W2 O22 44(3) . . . . ?
P1 O4 W2 O3 -30.6(12) . . . . ?
P1 O4 W2 O6 132.5(12) . . . . ?
P1 O4 W2 O17 44.6(11) . . . . ?
Si1 O17 W2 O5 169(4) . . . . ?
W1 O17 W2 O5 -46(4) . . . . ?
Si1 O17 W2 O22 -52.6(7) . . . . ?
W1 O17 W2 O22 93.0(5) . . . . ?
Si1 O17 W2 O3 -144.1(7) . . . . ?
W1 O17 W2 O3 1.4(3) . . . . ?
Si1 O17 W2 O6 38.9(8) . . . . ?
W1 O17 W2 O6 -175.5(6) . . . . ?
Si1 O17 W2 O4 127.7(8) . . . . ?
W1 O17 W2 O4 -86.7(5) . . . . ?
W4 O8 W3 O7 137.7(13) . . . . ?
W4 O8 W3 O6 -120.3(12) . . . . ?
W4 O8 W3 O24 35.9(13) . . . . ?
W4 O8 W3 O23 -27(2) . . . . ?
W4 O8 W3 O20 -37.4(13) . . . . ?
W2 O6 W3 O7 -142.5(14) . . . . ?
W2 O6 W3 O8 114.5(13) . . . . ?
W2 O6 W3 O24 20(3) . . . . ?
W2 O6 W3 O23 -41.2(14) . . . . ?
W2 O6 W3 O20 33.2(13) . . . . ?
W9 O24 W3 O7 -179.5(10) . . . . ?
W9 O24 W3 O8 -78.0(9) . . . . ?
W9 O24 W3 O6 18(2) . . . . ?
W9 O24 W3 O23 80.2(9) . . . . ?
W9 O24 W3 O20 4.4(8) . . . . ?
W8 O23 W3 O7 179.5(9) . . . . ?
W8 O23 W3 O8 -16(2) . . . . ?
W8 O23 W3 O6 79.4(9) . . . . ?
W8 O23 W3 O24 -79.6(9) . . . . ?
W8 O23 W3 O20 -5.1(7) . . . . ?
Si1 O20 W3 O7 -177(5) . . . . ?
W9 O20 W3 O7 -42(6) . . . . ?
W8 O20 W3 O7 51(6) . . . . ?
Si1 O20 W3 O8 -48.4(8) . . . . ?
W9 O20 W3 O8 86.4(6) . . . . ?
W8 O20 W3 O8 179.3(6) . . . . ?
Si1 O20 W3 O6 47.7(8) . . . . ?
W9 O20 W3 O6 -177.5(6) . . . . ?
W8 O20 W3 O6 -84.6(6) . . . . ?
Si1 O20 W3 O24 -137.9(9) . . . . ?
W9 O20 W3 O24 -3.1(5) . . . . ?
W8 O20 W3 O24 89.8(6) . . . . ?
Si1 O20 W3 O23 135.9(9) . . . . ?
W9 O20 W3 O23 -89.2(6) . . . . ?
```

```
W8 O20 W3 O23 3.6(5) . . . . ?
W9 O25 W4 O9 123.1(13) . . . . ?
W9 O25 W4 O11 -135.0(12) . . . . ?
W9 O25 W4 O8 24.4(12) . . . . ?
W9 O25 W4 O10 -51(3) . . . . ?
W9 O25 W4 O18 -60.5(12) . . . . ?
W5 O11 W4 O9 -171.4(8) . . . . ?
W5 O11 W4 O25 88.2(5) . . . . ?
W5 O11 W4 O8 -3.1(17) . . . . ?
W5 O11 W4 O10 -76.4(6) . . . . ?
W5 O11 W4 O18 2.9(3) . . . . ?
W3 O8 W4 O9 -114.1(14) . . . . ?
W3 O8 W4 O25 -14.4(13) . . . . ?
W3 O8 W4 O11 77(2) . . . . ?
W3 O8 W4 O10 150.5(13) . . . . ?
W3 O8 W4 O18 71.7(13) . . . . ?
P2 O10 W4 O9 129.8(14) . . . . ?
P2 O10 W4 O25 -56(3) . . . . ?
P2 O10 W4 O11 28.8(13) . . . . ?
P2 O10 W4 O8 -131.5(13) . . . . ?
P2 O10 W4 O18 -46.4(12) . . . . ?
Si1 O18 W4 O9 -162(5) . . . . ?
W5 O18 W4 O9 53(6) . . . . ?
Si1 O18 W4 O25 49.1(7) . . . . ?
W5 O18 W4 O25 -95.6(4) . . . . ?
Si1 O18 W4 O11 142.4(7) . . . . ?
W5 O18 W4 O11 -2.2(3) . . . . ?
Si1 O18 W4 O8 -39.7(8) . . . . ?
W5 O18 W4 O8 175.6(5) . . . . ?
Si1 O18 W4 O10 -128.4(8) . . . . ?
W5 O18 W4 O10 87.0(5) . . . . ?
W6 O14 W5 O13 112.6(14) . . . . ?
W6 O14 W5 O26 11.2(13) . . . . ?
W6 O14 W5 O11 -78(2) . . . . ?
W6 O14 W5 O12 -152.5(13) . . . . ?
W6 O14 W5 O18 -74.0(12) . . . . ?
W10 O26 W5 O13 -127.0(12) . . . . ?
W10 O26 W5 O14 -23.9(13) . . . . ?
W10 O26 W5 O11 135.5(12) . . . . ?
W10 O26 W5 O12 68(3) . . . . ?
W10 O26 W5 O18 61.2(12) . . . . ?
W4 O11 W5 O13 170.8(7) . . . . ?
W4 O11 W5 O14 1.0(17) . . . . ?
W4 O11 W5 O26 -88.3(5) . . . . ?
W4 O11 W5 O12 76.5(6) . . . . ?
W4 O11 W5 O18 -2.9(3) . . . . ?
P2 O12 W5 O13 -127.9(15) . . . . ?
P2 O12 W5 O14 129.5(14) . . . . ?
P2 O12 W5 O26 38(3) . . . . ?
P2 O12 W5 O11 -30.7(14) . . . . ?
P2 O12 W5 O18 44.3(14) . . . . ?
Si1 O18 W5 O13 179(80) . . . . ?
W4 O18 W5 O13 -36(4) . . . . ?
Si1 O18 W5 O14 38.4(7) . . . . ?
W4 O18 W5 O14 -176.4(5) . . . . ?
Si1 O18 W5 O26 -52.9(7) . . . . ?
W4 O18 W5 O26 92.3(5) . . . . ?
Si1 O18 W5 O11 -143.0(6) . . . . ?
W4 O18 W5 O11 2.2(3) . . . . ?
Si1 O18 W5 O12 129.0(7) . . . . ?
W4 O18 W5 O12 -85.8(5) . . . . ?
W1 O16 W6 O15 131.8(13) . . . . ?
W1 O16 W6 O28 31.4(13) . . . . ?
W1 O16 W6 O14 -123.1(12) . . . . ?
W1 O16 W6 O27 -38(2) . . . . ?
W1 O16 W6 O19 -43.2(12) . . . . ?
```

```
W7 O28 W6 O15 179.7(9) . . . . ?
W7 O28 W6 O16 -76.9(9) . . . . ?
W7 O28 W6 O14 12(2) . . . . ?
W7 O28 W6 O27 80.0(9) . . . . ?
W7 O28 W6 O19 3.4(7) . . . . ?
W5 O14 W6 O15 -134.2(13) . . . . ?
W5 O14 W6 O16 121.6(12) . . . . ?
W5 O14 W6 O28 33(2) . . . . ?
W5 O14 W6 O27 -33.9(13) . . . . ?
W5 O14 W6 O19 41.7(12) . . . . ?
W10 O27 W6 O15 -179.2(9) . . . . ?
W10 O27 W6 O16 -10(2) . . . . ?
W10 O27 W6 O28 -79.7(8) . . . . ?
W10 O27 W6 O14 76.7(8) . . . . ?
W10 O27 W6 O19 -4.0(7) . . . . ?
Si1 O19 W6 O15 -174(5) . . . . ?
W10 O19 W6 O15 53(5) . . . . ?
W7 O19 W6 O15 -39(5) . . . . ?
Si1 O19 W6 O16 -46.7(8) . . . . ?
W10 O19 W6 O16 -179.4(6) . . . . ?
W7 O19 W6 O16 88.3(6) . . . . ?
Si1 O19 W6 O28 -137.4(9) . . . . ?
W10 O19 W6 O28 89.8(6) . . . . ?
W7 O19 W6 O28 -2.4(5) . . . . ?
Si1 O19 W6 O14 46.3(8) . . . . ?
W10 O19 W6 O14 -86.5(6) . . . . ?
W7 O19 W6 O14 -178.7(6) . . . . ?
Si1 O19 W6 O27 135.7(9) . . . . ?
W10 O19 W6 O27 3.0(5) . . . . ?
W7 O19 W6 O27 -89.3(6) . . . . ?
W8 O30 W7 O29 -150.4(16) . . . . ?
W8 O30 W7 O36 108.6(15) . . . . ?
W8 O30 W7 O28 17(2) . . . . ?
W8 O30 W7 O21 -47.2(15) . . . . ?
W8 O30 W7 O19 35.1(15) . . . . ?
W10 O36 W7 O29 169.4(9) . . . . ?
W10 O36 W7 O30 -90.0(9) . . . . ?
W10 O36 W7 O28 68.1(10) . . . . ?
W10 O36 W7 O21 0(2) . . . . ?
W10 O36 W7 O19 -7.5(8) . . . . ?
W6 O28 W7 O29 -177.6(9) . . . . ?
W6 O28 W7 O30 15(2) . . . . ?
W6 O28 W7 O36 -77.0(9) . . . . ?
W6 O28 W7 O21 80.4(9) . . . . ?
W6 O28 W7 O19 -3.4(7) . . . . ?
W1 O21 W7 O29 -150.7(13) . . . . ?
W1 O21 W7 O30 109.3(14) . . . . ?
W1 O21 W7 O36 19(3) . . . . ?
W1 O21 W7 O28 -50.9(13) . . . . ?
W1 O21 W7 O19 25.8(13) . . . . ?
Si1 O19 W7 O29 -159(5) . . . . ?
W10 O19 W7 O29 -24(6) . . . . ?
W6 O19 W7 O29 66(6) . . . . ?
Si1 O19 W7 O30 -36.3(9) . . . . ?
W10 O19 W7 O30 99.2(4) . . . . ?
W6 O19 W7 O30 -170.6(4) . . . . ?
Si1 O19 W7 O36 -130.1(10) . . . . ?
W10 O19 W7 O36 5.4(6) . . . . ?
W6 O19 W7 O36 95.6(6) . . . . ?
Si1 O19 W7 O28 136.7(10) . . . . ?
W10 O19 W7 O28 -87.7(6) . . . . ?
W6 O19 W7 O28 2.4(5) . . . . ?
Si1 O19 W7 O21 52.9(9) . . . . ?
W10 O19 W7 O21 -171.6(6) . . . . ?
W6 O19 W7 O21 -81.4(5) . . . . ?
W3 O23 W8 O31 178.7(9) . . . . ?
```

```
W3 O23 W8 O32 77.4(9) . . . . ?
W3 O23 W8 O30 -14.3(19) . . . . ?
W3 O23 W8 O22 -81.5(9) . . . . ?
W3 O23 W8 O20 5.1(7) . . . . ?
W9 O32 W8 O31 -165.9(9) . . . . ?
W9 O32 W8 O23 -66.1(9) . . . . ?
W9 O32 W8 O30 91.5(8) . . . . ?
W9 O32 W8 O22 4(2) . . . . ?
W9 O32 W8 O20 8.3(7) . . . . ?
W7 O30 W8 O31 149.5(16) . . . . ?
W7 O30 W8 O23 -17(2) . . . . ?
W7 O30 W8 O32 -108.7(15) . . . . ?
W7 O30 W8 O22 49.1(15) . . . . ?
W7 O30 W8 O20 -36.2(15) . . . . ?
W2 O22 W8 O31 150.7(13) . . . . ?
W2 O22 W8 O23 51.9(13) . . . . ?
W2 O22 W8 O32 -20(3) . . . . ?
W2 O22 W8 O30 -107.5(12) . . . . ?
W2 O22 W8 O20 -23.3(12) . . . . ?
Si1 O20 W8 O31 174(5) . . . . ?
W9 O20 W8 O31 38(5) . . . . ?
W3 O20 W8 O31 -53(5) . . . . ?
Si1 O20 W8 O23 -136.3(10) . . . . ?
W9 O20 W8 O23 87.8(6) . . . . ?
W3 O20 W8 O23 -3.7(5) . . . . ?
Si1 O20 W8 O32 129.9(10) . . . . ?
W9 O20 W8 O32 -6.0(5) . . . . ?
W3 O20 W8 O32 -97.5(6) . . . . ?
Si1 O20 W8 O30 36.4(8) . . . . ?
W9 O20 W8 O30 -99.5(4) . . . . ?
W3 O20 W8 O30 169.0(4) . . . . ?
Si1 O20 W8 O22 -51.6(9) . . . . ?
W9 O20 W8 O22 172.5(6) . . . . ?
W3 O20 W8 O22 81.0(5) . . . . ?
W3 O24 W9 O33 -177.5(10) . . . . ?
W3 O24 W9 O32 -77.5(9) . . . . ?
W3 O24 W9 O25 80.3(9) . . . . ?
W3 O24 W9 O34 15(2) . . . . ?
W3 O24 W9 O20 -4.4(8) . . . . ?
W8 O32 W9 O33 166.8(9) . . . . ?
W8 O32 W9 O24 65.8(9) . . . . ?
W8 O32 W9 O25 -5(2) . . . . ?
W8 O32 W9 O34 -91.5(8) . . . . ?
W8 O32 W9 O20 -8.3(7) . . . . ?
W4 O25 W9 O33 -150.8(12) . . . . ?
W4 O25 W9 O24 -51.2(12) . . . . ?
W4 O25 W9 O32 21(2) . . . . ?
W4 O25 W9 O34 108.2(12) . . . . ?
W4 O25 W9 O20 24.1(12) . . . . ?
W10 O34 W9 O33 -153.3(15) . . . . ?
W10 O34 W9 O24 14(2) . . . . ?
W10 O34 W9 O32 106.4(14) . . . . ?
W10 O34 W9 O25 -50.3(14) . . . . ?
W10 O34 W9 O20 33.0(14) . . . . ?
Si1 O20 W9 O33 -165(4) . . . . ?
W8 O20 W9 O33 -31(5) . . . . ?
W3 O20 W9 O33 61(5) . . . . ?
Si1 O20 W9 O24 137.0(11) . . . . ?
W8 O20 W9 O24 -88.4(6) . . . . ?
W3 O20 W9 O24 3.2(5) . . . . ?
Si1 O20 W9 O32 -128.6(10) . . . . ?
W8 O20 W9 O32 6.0(5) . . . . ?
W3 O20 W9 O32 97.6(6) . . . . ?
Si1 O20 W9 O25 52.6(9) . . . . ?
W8 O20 W9 O25 -172.8(6) . . . . ?
W3 O20 W9 O25 -81.2(5) . . . . ?
```

```
Si1 O20 W9 O34 -35.4(9) . . . . ?
W8 O20 W9 O34 99.2(4) . . . . ?
W3 O20 W9 O34 -169.2(4) . . . . ?
W9 O34 W10 O35 152.0(14) . . . . ?
W9 O34 W10 O27 -15(2) . . . . ?
W9 O34 W10 O26 51.2(14) . . . . ?
W9 O34 W10 O36 -106.2(14) . . . . ?
W9 O34 W10 O19 -33.5(14) . . . . ?
W6 O27 W10 O35 178.1(9) . . . . ?
W6 O27 W10 O34 -15(2) . . . . ?
W6 O27 W10 O26 -82.0(8) . . . . ?
W6 O27 W10 O36 77.0(9) . . . . ?
W6 O27 W10 O19 4.0(7) . . . . ?
W5 O26 W10 O35 150.2(12) . . . . ?
W5 O26 W10 O34 -109.2(12) . . . . ?
W5 O26 W10 O27 52.9(12) . . . . ?
W5 O26 W10 O36 -16(3) . . . . ?
W5 O26 W10 O19 -24.3(12) . . . . ?
W7 O36 W10 O35 -167.3(9) . . . . ?
W7 O36 W10 O34 91.5(9) . . . . ?
W7 O36 W10 O27 -69.2(10) . . . . ?
W7 O36 W10 O26 -1(2) . . . . ?
W7 O36 W10 O19 7.5(8) . . . . ?
Si1 O19 W10 O35 173(5) . . . . ?
W7 O19 W10 O35 36(5) . . . . ?
W6 O19 W10 O35 -54(5) . . . . ?
Si1 O19 W10 O34 37.6(8) . . . . ?
W7 O19 W10 O34 -99.1(4) . . . . ?
W6 O19 W10 O34 171.0(4) . . . . ?
Si1 O19 W10 O27 -136.3(10) . . . . ?
W7 O19 W10 O27 87.0(6) . . . . ?
W6 O19 W10 O27 -2.9(5) . . . . ?
Si1 O19 W10 O26 -51.9(9) . . . . ?
W7 O19 W10 O26 171.4(6) . . . . ?
W6 O19 W10 O26 81.4(5) . . . . ?
Si1 O19 W10 O36 131.4(10) . . . . ?
W7 O19 W10 O36 -5.3(6) . . . . ?
W6 O19 W10 O36 -95.2(6) . . . . ?
C10 C9 N1 C13 -180(2) . . . . ?
C10 C9 N1 C5 56(3) . . . . ?
C10 C9 N1 C17 -60(3) . . . . ?
C14 C13 N1 C9 -175(2) . . . . ?
C14 C13 N1 C5 -52(3) . . . . ?
C14 C13 N1 C17 65(3) . . . . ?
C6 C5 N1 C9 62(3) . . . . ?
C6 C5 N1 C13 -60(3) . . . . ?
C6 C5 N1 C17 -180(3) . . . . ?
C18 C17 N1 C9 -51(3) . . . . ?
C18 C17 N1 C13 68(3) . . . . ?
C18 C17 N1 C5 -171(2) . . . . ?
C26 C25 N2 C21 58(5) . . . . ?
C26 C25 N2 C33 -174(4) . . . . ?
C26 C25 N2 C29 -77(4) . . . . ?
C22 C21 N2 C25 129(5) . . . . ?
C22 C21 N2 C33 9(7) . . . . ?
C22 C21 N2 C29 -108(6) . . . . ?
C34 C33 N2 C25 -67(4) . . . . ?
C34 C33 N2 C21 59(5) . . . . ?
C34 C33 N2 C29 -169(3) . . . . ?
C30 C29 N2 C25 91(5) . . . . ?
C30 C29 N2 C21 -39(6) . . . . ?
C30 C29 N2 C33 -166(5) . . . . ?
C44 C43 N3 C39 179.7(19) . . . . ?
C44 C43 N3 C37 -57(2) . . . . ?
C44 C43 N3 C41 57(2) . . . . ?
C40 C39 N3 C43 -171.7(19) . . . . ?
```

```
C40 C39 N3 C37 67(2) . . . . ?
C40 C39 N3 C41 -48(2) . . . . ?
C38 C37 N3 C43 -58(2) . . . . ?
C38 C37 N3 C39 64(2) . . . . ?
C38 C37 N3 C41 -177.1(17) . . . . ?
C42 C41 N3 C43 63(2) . . . . ?
C42 C41 N3 C39 -60(2) . . . . ?
C42 C41 N3 C37 -179.9(19) . . . . ?

_diffrn_measured_fraction_theta_max    0.962
_diffrn_reflns_theta_full              70.69
_diffrn_measured_fraction_theta_full   0.962
_refine_diff_density_max    2.043
_refine_diff_density_min   -0.962
_refine_diff_density_rms    0.201
```